

UNA INTRODUCCIÓN A LA INTEGRACIÓN GEOMÉTRICA

FERNANDO JIMÉNEZ

RESUMEN. Dedicamos estas notas al estudio de ciertos integradores geométricos para sistemas hamiltonianos. Con integradores geométricos nos referimos a métodos numéricos de un paso y orden bajo (no consideraremos métodos Runge–Kutta) que preservan en el tiempo discreto algunas (o todas) de las propiedades cualitativas de los sistemas continuos que aproximan. En particular, nos centraremos en dos de los principales rasgos de los sistemas hamiltonianos: la simplecticidad y la preservación de la función hamiltoniana. Presentaremos integradores diseñados para preservar cada uno de ellos y en ocasiones ambos; puntualizaremos en qué circunstancias ocurre esta coincidencia y en cuáles no, que es el caso más habitual. Además, daremos una explicación razonada del buen comportamiento de los integradores simplécticos cuando no preservan exactamente la función hamiltoniana, explicación basada en el *backward error analysis*. Estas notas suponen el material en el que se basa el curso homónimo impartido en el Congreso Monteiro 2021.

1. INTRODUCCIÓN

En pocas palabras, podemos decir que integrar numéricamente un sistema de ecuaciones diferenciales (en derivadas parciales u ordinarias, caso este último en el que nos vamos a centrar) consiste en encontrar una aproximación *satisfactoria* a su solución exacta cuando no disponemos de ésta. No disponer de ella es la circunstancia más común cuando uno se enfrenta a un problema científico en la práctica, y por ello este campo de las matemáticas tiene tanta relevancia. A esa aproximación numérica (que también denominaremos versión *discreta* del sistema de ecuaciones diferenciales) la llamamos *integrador*, y definir cuándo éste es satisfactorio o no motivo de debate. A día de hoy, para que eso ocurra el integrador debe conseguir un equilibrio entre la precisión (error en la aproximación), estabilidad, el coste computacional (ya que empleamos ordenadores para implementarlos en la práctica) y preservación de estructura geométrica. Tradicionalmente se ha prestado más atención a los tres primeros aspectos, mientras que sólo a partir de los años 80 del siglo pasado la comunidad científica ha comenzado a estudiar profundamente el último.

Con estructura geométrica nos referimos a todos aquellos rasgos de los sistemas de ecuaciones diferenciales que no son la dinámica temporal de sus variables. Es decir, el estudio de estas ecuaciones también nos habla del espacio en el que evolucionan (que puede ser euclídeo o con curvatura), de si tienen alguna simetría (discreta como la reversión temporal, o continua como la invariancia bajo un grupo de Lie) y, finalmente, de si hay ciertas cantidades (integrales primeras) u otros aspectos geométricos (forma simpléctica, volumen) que se preservan bajo la dinámica. Con esto, definimos la *integración geométrica* de la siguiente manera:

La integración geométrica es el área de las matemáticas que lidia con la integración numérica de ecuaciones diferenciales al tiempo que se preservan ciertas propiedades geométricas del sistema hasta la precisión de la máquina.

Grosso modo, podemos clasificar los integradores geométricos en las siguientes categorías:

1. Integradores simplécticos (sistemas hamiltonianos).
2. Integradores que preservan simetrías.
3. Integradores que preservan volumen.
4. Integradores que preservan integrales primeras.
5. Integradores que preservan la variedad en la que evoluciona el sistema continuo.

Conseguir integradores que satisfagan alguna de las propiedades anteriores en el tiempo discreto hace de ellos aproximaciones más estables, sobre todo para simulaciones de largo rango, ya que los convierte en sistemas más *similares* a aquél que están tratando de aproximar. Como contrapeso, es raro encontrar alguno que satisfaga todas las propiedades a la vez. Además, es habitual que los integradores geométricos sean computacionalmente más costosos que los otros, ya que les estamos pidiendo un “esfuerzo mayor” al tratar de emular el comportamiento continuo. Como rasgos positivos, podemos enlistar los siguientes [11]:

- Las simulaciones pueden ser arbitrariamente largas, ya que no aparecen efectos físicamente espurios.
- Por medio del estudio geométrico de los sistemas de ecuaciones diferenciales se pueden construir integradores geométricos sencillos, rápidos y estables.
- Los resultados numéricos se pueden considerar cualitativamente correctos incluso cuando encontramos dinámicas caóticas.
- En algunos sistemas, los errores cuantitativos son menores que para otros métodos que no son geométricos.

Por su relevancia en física e ingeniería (además de por la finitud del curso), nos centraremos en estas notas en sistemas hamiltonianos y en dos de sus características geométricas principales (1 y 4 en la lista de arriba): la *simplecticidad* y la preservación de su integral primera que viene definida por la función hamiltoniana. Esta integral primera es relevante para una clase muy amplia de sistemas físicos (los denominados *conservativos*), pues define su energía total. Nuestro objetivo es estudiar con el grado de rigor que le corresponde a estudiantes recién egresados de su licenciatura los integradores geométricos que preservan una o ambas características y cómo se relacionan entre sí. Por simplicidad, emplearemos métodos de un paso de orden bajo, y particularizaremos en tres de ellos (el método Euler Explícito, el Euler Simpléctico I y el Punto Medio), lo que nos permitirá realizar algunos cálculos de manera analítica. Trataremos de ser autocontenidos y de definir todos los conceptos de manera consistente. Veremos que no todos los integradores simplécticos preservan la energía; en caso de que no lo hagan, daremos una explicación. Por otro lado, razonaremos también por qué los integradores simplécticos que no preservan la energía de manera exacta lo hacen de forma aproximada, oscilatoria y acotada (lo que se ilustra debidamente mediante el comportamiento del Euler Simpléctico I). Este es el resultado final de las notas y tal vez el más sobresaliente en ellas.

La estructura del texto es como sigue: §2 está dedicada a la definición de las nociones básicas sobre integradores de un paso, principalmente el error local y global. En §3 presentamos los sistemas hamiltonianos y definimos sus rasgos geométricos de interés: la preservación de la función hamiltoniana y la simplecticidad. Definimos estos sistemas tanto en un espacio euclídeo como en una variedad diferenciable. §4 está dedicada a la descripción de integradores (para cierto tipo de sistemas dinámicos) que preservan ciertas integrales primeras: veremos que los sistemas hamiltonianos son un caso particular, así como lo es la función hamiltoniana de estas integrales. Finalmente, en §5 estudiamos los integradores simplécticos, es decir, aquellos que preservan la forma simpléctica, y establecemos cómo se comportan en relación a la evolución de la energía.

2. MÉTODOS DE UN PASO COMO APROXIMACIÓN DE SOLUCIONES DE EDOs

Definamos en primer lugar un sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias (EDOs) en el intervalo temporal $t \in [0, T] \subset \mathbb{R}$:

$$\dot{x} := \frac{dx}{dt} = f(x), \quad x(0) = x_0, \quad (1)$$

donde $x, x_0 \in \mathbb{R}^n$, $f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$ y $n \in \mathbb{N}$. Denominaremos la aplicación f como *campo vectorial*. Bajo ciertas condiciones de regularidad (asumiremos a partir de ahora que $f \in C^\infty$), el problema de valor inicial (1) admite una solución única $x: [0, T] \rightarrow \mathbb{R}^n$, que asumiremos también C^∞ .¹ En el futuro, diremos de manera indistinta que $\dot{x} = f(x)$ son las *ecuaciones continuas de movimiento* de la variable x , sus *ecuaciones dinámicas continuas* o, simplemente, su *dinámica continua*.

Cuando la solución $x(t)$ no es accesible, una técnica habitual es definir una aproximación numérica a la misma [8, 9], que denominaremos de manera indistinta *esquemas numéricos*, *métodos numéricos* o *integradores numéricos*. Nos centraremos en estas notas en los denominados *métodos de un paso*. Para definirlos, es necesario establecer previamente una malla temporal de la siguiente forma:

$$\{t_k\}_{k=0:N} = \{t_0, t_1, t_2, \dots, t_N\}, \quad \text{con } t_k = hk, \quad k \in \{0\} \cup \mathbb{N}, \quad \text{y } h = T/N.$$

Los integradores numéricos de un paso se definen como

$$\frac{x_{k+1} - x_k}{h} = f_h(x_k, x_{k+1}), \quad (2)$$

donde $x_k \sim x(t_k)$, esto es, cada x_k será una aproximación de la solución exacta en t_k .² La aplicación $f_h: \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$ (que consideraremos C^∞ en ambas variables), se denomina, desde el punto de vista del análisis numérico, como *función incremento*. En caso de que no haya dependencia de x_{k+1} en f_h , decimos que el método es *explícito*; en caso contrario, decimos que el método es *implícito*.

Teniendo en cuenta que (2) se puede considerar como el análogo discreto de las EDOs en (1), en estas notas denominaremos f_h *campo vectorial discreto*. De manera indistinta, denominaremos (2) como las *ecuaciones de movimiento discretas* de la variable x , sus *ecuaciones dinámicas discretas* o, simplemente, su *dinámica discreta*.

Para simplificar la notación, haremos las identificaciones $x' \equiv x_{k+1}$, $x \equiv x_k$, $t_k \equiv t$ y $t' \equiv t_{k+1} = t_k + h = t + h$, lo que da lugar a nuestro sistema dinámico discreto (2) en las nuevas variables:

$$\frac{x' - x}{h} = f_h(x, x'). \quad (3)$$

En resumidas cuentas, la dinámica discreta (2), (3) representa una aproximación de la dinámica continua (1). Para saber cuán “buena” (en el sentido dinámico) es esta aproximación debemos definir la noción de *error*, tanto local como global.

Definición 2.1 (Error local de truncación). Decimos que el integrador (3) tiene *error local de truncación* de orden r si

$$e'_h := |x' - x(t')| = O(h^{r+1}), \quad h \rightarrow 0,$$

¹Cuando las EDOs son no-autónomas, esto es, dependientes del tiempo $\dot{x} = \hat{f}(x, t)$, podemos utilizar un sistema extendido de la forma $\dot{x} = \hat{f}(x, x_{n+1})$, $\dot{x}_{n+1} = 1$, en el que todas las técnicas prescritas para sistemas autónomos son válidas.

²No consideraremos en estas notas los métodos Runge–Kutta (que implican nodos internos entre t_k y t_{k+1}), a pesar de que formalmente también son métodos de un paso.

donde $|\cdot|$ es una norma adecuadamente definida en \mathbb{R}^n . En este caso, decimos indistintamente que el integrador es *de orden r* o *consistente de orden r* . \diamond

De manera intuitiva podemos establecer que nuestra aproximación a la dinámica continua será mejor cuanto *menor* sea el error local cometido, lo que viene indicado por el orden del método: cuanto mayor sea el orden, menor será el error. El error local de truncación se puede calcular de manera explícita por medio de desarrollos de Taylor cuando $h \rightarrow 0$. Esto es,

$$\begin{aligned} x(t') &= x(t+h) = x(t) + h\dot{x}(t) + \frac{h^2}{2!}\ddot{x}(t) + \frac{h^3}{3!}\ddot{\ddot{x}}(t) + \dots \\ &= x + hf(x) + \frac{h^2}{2!}\frac{d}{dt}f(x) + \frac{h^3}{3!}\frac{d^2}{dt^2}f(x) + \dots \\ &= x + hf_0(x) + h^2f_1(x) + h^3f_2(x) + \dots, \end{aligned} \quad (4)$$

donde hemos fijado $x(t) = x$. Vemos $f_0 = f$ y que la serie formal

$$x(t') = x + h \sum_{i=0}^{\infty} h^i f_i(x), \quad \text{con} \quad f_i = \frac{1}{(i+1)!} \frac{d^i}{dt^i} f,$$

donde $f_i : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$, se puede establecer completamente a partir del campo vectorial $f(x)$ y sus derivadas.

Por otro lado, a partir de (3)

$$\begin{aligned} x' &= x + hf_h(x, x') = x + hf_h(x, x + hf_h(x, x')) \\ &= x + h(f_h(x, x) + h\nabla_y f_h(x, x) \cdot f_h(x, x') + \dots) \\ &= x + hf_{h,0}(x) + h^2 f_{h,1}(x) + h^3 f_{h,2}(x) + \dots \end{aligned} \quad (5)$$

Hemos empleado ∇_y , denotando el jacobiano respecto a la segunda variable y \cdot el producto entre matrices de cualquier tamaño siempre que esté bien definido. Vemos que la serie formal tras la última igualdad se obtiene tras tomar todas las expansiones de Taylor necesarias gracias a la regularidad C^∞ asumida para f_h .

A partir de la Definición 2.1 y de (4), (5), obtenemos

$$e'_h = |h(f_0 - f_{h,0}) + h^2(f_1 - f_{h,1}) + h^3(f_2 - f_{h,2}) + O(h^4)|. \quad (6)$$

Estamos asumiendo que $x(t_k) = x$, lo que es conveniente para determinar el error del método (3) al dar un paso en el tiempo discreto. Por otro lado, es requisito para que el método sea *de hecho* una aproximación a la dinámica continua que

$$f_{h,0} = f_0 = f. \quad (7)$$

En ese caso decimos que el método es (al menos) *consistente*. Que tenga un orden superior vendrá determinado por la coincidencia de los campos vectoriales continuos y discretos. Como se sigue fácilmente de (6), si esta coincidencia llega hasta $f_r = f_{h,r}$, el método será de orden r . Finalmente, apuntamos que se pueden construir métodos de orden arbitrario estableciendo desde el inicio la coincidencia de campos vectoriales; a este tipo de métodos se los denomina de Taylor [9], que tienen la desventaja de ser muy costosos a nivel computacional (ya que los campos vectoriales f_i involucran i derivadas de f).

Ejemplo 2.1. Sea el sistema dinámico en \mathbb{R}^2

$$\begin{pmatrix} \dot{x}_1 \\ \dot{x}_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x_2 \\ -x_1 \end{pmatrix}; \quad f(x_1, x_2) = \begin{pmatrix} x_2 \\ -x_1 \end{pmatrix}. \quad (8)$$

Podemos calcular que

$$f_0 = f, \quad f_1 = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} -x_1 \\ -x_2 \end{pmatrix}, \quad f_2 = \frac{1}{6} \begin{pmatrix} -x_2 \\ x_1 \end{pmatrix}, \quad f_3 \neq 0, \quad f_4 \dots \quad (9)$$

Respecto a la dinámica discreta consideraremos tres métodos:

- Euler Explícito:

$$\begin{pmatrix} \frac{x'_1 - x_1}{h} \\ \frac{x'_2 - x_2}{h} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x_2 \\ -x_1 \end{pmatrix},$$

para el que

$$f_{h,0} = f.$$

- Euler Simpléctico I (el adjetivo “simpléctico” quedará definido más adelante):

$$\begin{pmatrix} \frac{x'_1 - x_1}{h} \\ \frac{x'_2 - x_2}{h} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x'_2 \\ -x_1 \end{pmatrix}, \quad (10)$$

para el que

$$f_{h,0} = f, \quad f_{h,1} = \begin{pmatrix} -x_1 \\ 0 \end{pmatrix}.$$

- Punto Medio:

$$\begin{pmatrix} \frac{x'_1 - x_1}{h} \\ \frac{x'_2 - x_2}{h} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{x_2 + x'_2}{2} \\ -\frac{x_1 + x'_1}{2} \end{pmatrix}, \quad (11)$$

para el que

$$f_{h,0} = f, \quad f_{h,1} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} -x_1 \\ -x_2 \end{pmatrix}, \quad f_{h,2} = \frac{1}{4} \begin{pmatrix} -x_2 \\ x_1 \end{pmatrix}.$$

Teniendo en cuenta la ecuación (6) y comparando los campos discretos $f_{h,i}$ con los campos continuos f_i (9), vemos que los métodos Euler Explícito y Euler Simpléctico I tienen orden 1, mientras que el Punto Medio tiene orden 2. Mostramos comportamiento de la dinámica discreta de estos tres integradores para la variable x_1 en la Figura 1.

Por motivos que resultarán obvios más adelante, estaremos interesados en la cantidad $E : \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}$ definida por $E(x_1, x_2) = \frac{1}{2}x_1^2 + \frac{1}{2}x_2^2$, cantidad que se conserva en el tiempo por la dinámica continua (8) (es decir, $\dot{E} = 0$). Su evolución discreta vendrá dada por $E' = E(x'_1, x'_2)$, mostrada en la Figura 2. \diamond

Definición 2.2 (Error global). El error global de un método numérico se define como

$$e_{Nh} := |x_N - x(T)|,$$

esto es, el error cometido por el integrador después de $N - 1$ iteraciones respecto del valor exacto de la dinámica en su tiempo final $x(T)$. \diamond

El método se dirá *convergente* si $e_{Nh} \rightarrow 0$ cuando $h \rightarrow 0$. Condición necesaria para la convergencia es la consistencia, esto es (7). Para un método de un paso, asumiendo que es estable³, podemos encontrar una cota superior bien definida para el error global:

³A grandes rasgos, la estabilidad de un método numérico requiere que, cuando $h \rightarrow 0$, la solución numérica permanezca acotada; véase [8, § III.8, p. 436] para más detalles.

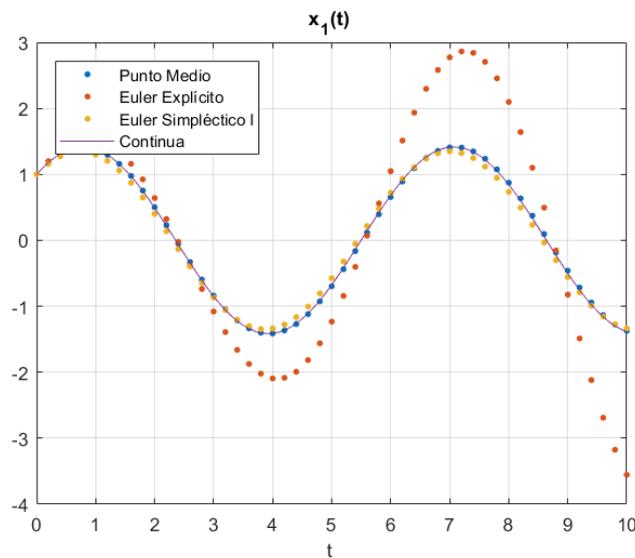


FIGURA 1. Observamos que los métodos Euler Simplético I y Punto Medio se ajustan a la dinámica con mucha mayor precisión (aunque tienen órdenes distintos) que el Euler Explícito, para el que vemos una deriva que aumenta con el tiempo.

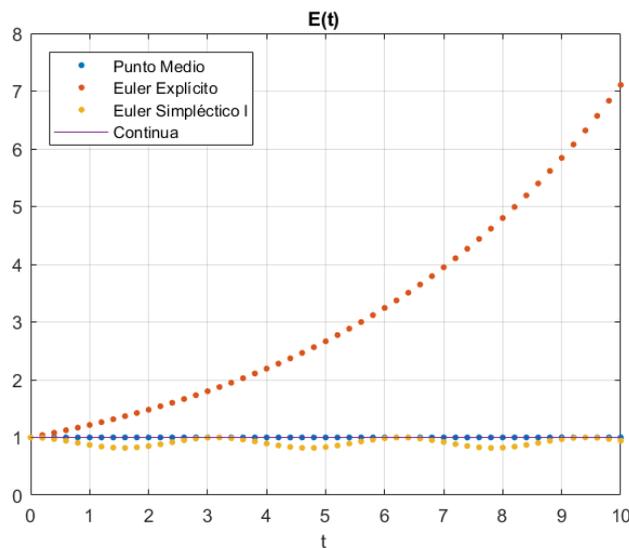


FIGURA 2. Vemos que el integrador Punto Medio también conserva la cantidad E en tiempo discreto, emulando el comportamiento continuo. El Euler Explícito presenta una deriva consistente con la deriva dinámica en la Figura 1, mientras que el Euler Simplético I muestra un comportamiento oscilatorio y acotado en torno al valor continuo cuya explicación es uno de los objetos principales de estas notas.

Teorema 2.1. Sea U un entorno abierto de $\{x(t) \mid 0 \leq t \leq T\}$, donde $x(t)$ es la solución de (1) y su campo vectorial f es Lipschitz continuo con constante L . Supongamos que el

método tiene error local de truncación de orden r (Definición 2.1), válido en U , lo que implica que $e'_h \leq Ch^{r+1}$. Entonces, cuando $h \rightarrow 0$, el error global puede ser estimado por

$$e_{Nh} \leq h^r \frac{C}{L} (\exp(LT) - 1). \quad (12)$$

Véase [8], §II.3, p. 160; para la demostración. Como vemos, podemos rephrasing el resultado anterior de la siguiente manera: si un integrador tiene error local de truncación de orden r , es decir, $e'_h = O(h^{r+1})$, entonces su error global será $e_{Nh} = O(h^r)$. O, más sucintamente,

$$e'_h = O(h^{r+1}) \quad \rightarrow \quad e_{Nh} = O(h^r).$$

Diremos en este caso que el método es convergente (vemos que se cumple la condición de convergencia $e_{Nh} \rightarrow 0$ cuando $h \rightarrow 0$) de orden r . Por otro lado, vemos que una representación logarítmica $\log(e_{Nh})$ vs. $\log(h)$ vendrá dada por una recta con pendiente r (como mostraremos un poco más adelante en la Figura 3). En la práctica, ésta es la forma de determinar el orden de convergencia de un método numérico, es decir, representar el valor del error global frente a h en escala logarítmica y hallar el valor de la pendiente de la recta obtenida.

Las nociones de error local y error global se pueden extrapolar a cualquier función (que en general estará relacionada con alguna cantidad física o geométrica relevante para nuestro sistema) que dependa de la variable dinámica x . Por ejemplo, sea $I : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ una función C^∞ . Sus errores local de truncación y global asociados al método (3) vendrán definidos por

$$e'_{I,h} := |I(x') - I(x(t'))| \quad \text{y} \quad e_{I,Nh} := |I(x_N) - I(x(T))|,$$

respectivamente. Hablaremos de orden r (en ambos casos) si $e'_{I,h} = O(h^{r+1})$ y $e_{I,Nh} = O(h^r)$.

3. SISTEMAS HAMILTONIANOS

3.1. Sistemas hamiltonianos en espacios euclídeos. Definiremos los sistemas hamiltonianos como sistemas de EDOs (1) en los que $n = 2d$ y $f(x) = J\nabla H(x)$:

$$\dot{x} = J\nabla H(x), \quad J = \begin{pmatrix} 0 & I_d \\ -I_d & 0 \end{pmatrix}, \quad H : \mathbb{R}^{2d} \rightarrow \mathbb{R}, \quad (13)$$

con I_d la matriz identidad en d -dimensiones y H una función que asumiremos C^∞ y que denominaremos indistintamente *función hamiltoniana* o *hamiltoniano*. Como es sabido, esta función representa la energía total para muchos sistemas físicos e ingenieriles [1]. El espacio de salida de H se denomina, en general, *espacio de fase*, en este caso \mathbb{R}^{2d} (consideraremos más adelante otro tipo de espacios que no son euclídeos). Como rasgo relevante, hacemos notar que la matriz J es antisimétrica, esto es,

$$J^T = -J. \quad (14)$$

Por comodidad y motivos históricos, denotaremos $q^i = x^i$ para $i = 1, \dots, d$; y $p_i = x^i$ para $i = d+1, \dots, 2d$.⁴ A partir de esta redefinición de las variables y de (13) vemos que las ecuaciones de los sistemas hamiltonianos se pueden escribir como

$$\dot{q}^i = \frac{\partial H}{\partial p_i}(q, p) := \nabla_{p_i} H(q, p), \quad \dot{p}_i = -\frac{\partial H}{\partial q^i}(q, p) := -\nabla_{q^i} H(q, p), \quad i = 1, \dots, d; \quad (15)$$

⁴La posición del índice para las variables p es irrelevante cuando el espacio de fase de H es \mathbb{R}^{2d} ; veremos que esta posición cobra sentido cuando generalizamos este espacio al fibrado cotangente de una variedad diferenciable.

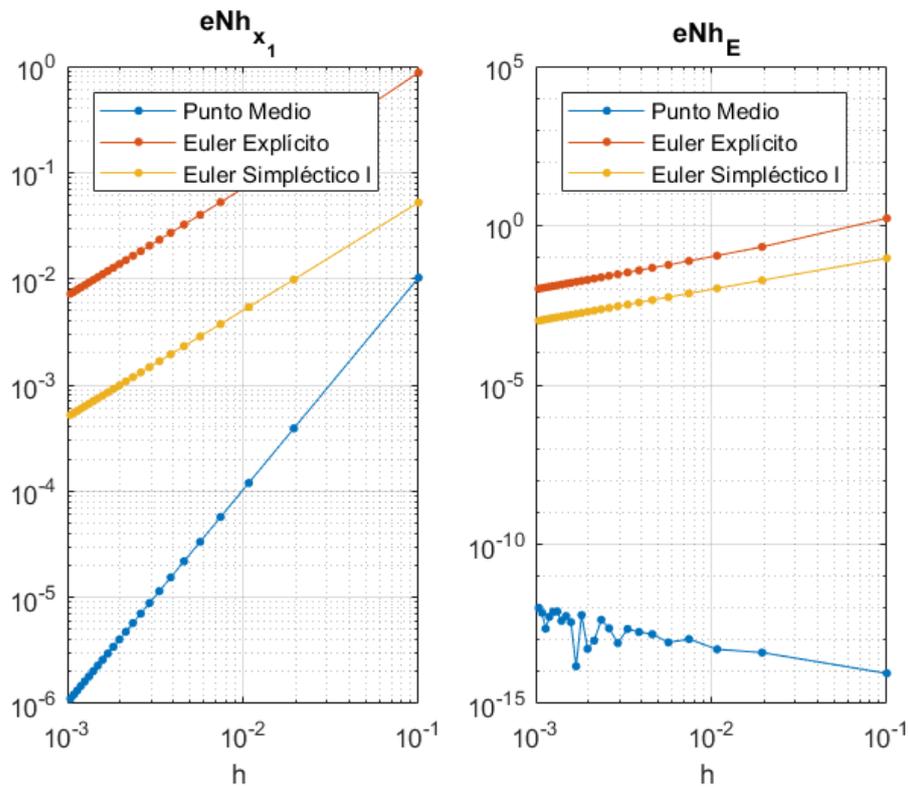


FIGURA 3. En el gráfico de la izquierda, vemos que la recta de error global (en la variable x_1) para Euler Explícito y Euler Simplético I son prácticamente paralelas, lo que es consistente con su orden de error local de truncación, 1 en ambos casos (también es consistente con el comportamiento dinámico que el “valor absoluto” del error sea menor para Euler Simplético I que para Euler Explícito). Por su lado, vemos que la pendiente para el Punto Medio es 2, de nuevo consistente con su error local de truncación. En el gráfico de la derecha, observamos un comportamiento análogo a la dinámica para los Euler en el caso de la cantidad E , mientras que vemos un error nulo (hasta la precisión de la máquina) para el Punto Medio, lo que es consistente con el comportamiento dinámico en la Figura 2.

esto es, la forma tradicional de las ecuaciones de Hamilton [1]. Utilizaremos indistintamente las expresiones (13) y (15) de las ecuaciones hamiltonianas dependiendo de su conveniencia.

Antes de describir los rasgos geométricos más relevantes de los sistemas hamiltonianos es importante indicar que en el espacio \mathbb{R}^{2d} se puede definir la siguiente forma *simpléctica* (esto es, una 2-forma cerrada y no-degenerada):

$$\omega = dx^i \wedge dx^{d+i} = dq^i \wedge dp_i, \quad i = 1, \dots, d, \quad (16)$$

donde empleamos ambas notaciones para las coordenadas de \mathbb{R}^{2d} , asumimos el criterio de Einstein para índices repetidos (lo que se hará en el futuro a menos que lo contrario sea establecido) y empleamos el producto exterior \wedge (esto es, el producto antisimétrico de vectores $u \wedge v = -(v \wedge u)$). Como es fácil de ver, J (13) es una representación matricial de ω (16).

El par $(\mathbb{R}^{2d}, \omega)$ es un ejemplo de *variedad simpléctica*, es decir, una *variedad diferenciable* [1] en la que se puede definir de manera global una forma simpléctica (consideraremos otros ejemplos más adelante, en particular el del fibrado cotangente de una variedad de configuración).

Como se adelantó en la introducción, nos centraremos en los dos rasgos geométricos más relevantes de los sistemas hamiltonianos, que son:

1. Conservación temporal de la función hamiltoniana. Esto es fácil de demostrar:

$$\dot{H}(x) = \nabla H(x) \dot{x} = \nabla H(x) J \nabla H(x) = 0,$$

lo que se sigue trivialmente de la antisimetría de J (14). En la práctica, esto quiere decir que la energía se conserva para cierta clase de sistemas físicos.

2. Simplecticidad:

Teorema 3.1. *La forma simpléctica (16) se conserva temporalmente a lo largo de las soluciones de los sistemas hamiltonianos (13), (15).*

Demostración. Realizaremos una prueba directa, esto es, calculando la derivada total con respecto al tiempo de la forma simpléctica, en la que utilizaremos las ecuaciones dinámicas (15) y la antisimetría del producto exterior:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \omega &= \dot{\omega} = d\dot{q}^i \wedge dp_i + dq^i \wedge d\dot{p}_i = d \left(\frac{\partial H}{\partial p_i} \right) \wedge dp_i - dq^i \wedge d \left(\frac{\partial H}{\partial q^i} \right) \\ &= \left(\frac{\partial^2 H}{\partial q^j \partial p_i} dq^j + \frac{\partial^2 H}{\partial p_j \partial p_i} dp_j \right) \wedge dp_i - dq^i \wedge \left(\frac{\partial^2 H}{\partial q^j \partial q^i} dq^j + \frac{\partial^2 H}{\partial p_j \partial q^i} dp_j \right) \\ &= \frac{\partial^2 H}{\partial q^j \partial p_i} dq^j \wedge dp_i + \frac{\partial^2 H}{\partial p_j \partial p_i} dp_j \wedge dp_i - \frac{\partial^2 H}{\partial q^j \partial q^i} dq^j \wedge dq^i - \frac{\partial^2 H}{\partial p_j \partial q^i} dq^i \wedge dp_j \\ &= \frac{\partial^2 H}{\partial q^j \partial p_i} dq^j \wedge dp_i - \frac{\partial^2 H}{\partial p_j \partial q^i} dq^i \wedge dp_j = 0, \end{aligned}$$

como queríamos demostrar. En la penúltima igualdad hemos utilizado que H es regular, por lo que las derivadas cruzadas son iguales. \square

Como vemos, la prueba realizada tiene un cariz fuertemente dinámico, a la vez que está relacionada con la geometría del espacio de fase de los sistemas hamiltonianos. Cuando consideremos otro tipo de espacios no euclídeos, apuntaremos una prueba del mismo resultado de tipo más geométrico-diferencial.

En términos de la geometría de los espacios euclídeos, la forma simpléctica se puede interpretar fácilmente en relación al área del espacio de fase, en este caso \mathbb{R}^{2d} . Sean dos vectores en \mathbb{R}^2 :

$$\xi = \begin{pmatrix} \xi_q \\ \xi_p \end{pmatrix}, \quad \eta = \begin{pmatrix} \eta_q \\ \eta_p \end{pmatrix}, \quad (17)$$

donde $\xi_q, \xi_p, \eta_q, \eta_p \in \mathbb{R}$, y el paralelogramo generado por ellos:

$$P = \{t\xi + s\eta \mid 0 \leq t \leq 1, 0 \leq s \leq 1\}.$$

El área de este paralelogramo viene definida por

$$A_P = \det \begin{pmatrix} \eta_q & \xi_q \\ \eta_p & \xi_p \end{pmatrix} = \eta_q \xi_p - \eta_p \xi_q,$$

que es igual a

$$\omega(\eta, \xi) = \eta^T J \xi. \quad (18)$$

En el lado izquierdo de esta última igualdad hemos tenido en cuenta (16) y la versión diferencial de (17), es decir, $\eta = \eta_q \partial_q + \eta_p \partial_p$ y $\xi = \xi_q \partial_q + \xi_p \partial_p$ (∂ representa la derivada parcial con respecto de cada una de las variables). En el lado derecho, la matriz J en (13) y la forma matricial de los vectores (17). Por tanto, en dos dimensiones la forma simpléctica representa, literalmente, el área del espacio de fase donde se define la función hamiltoniana. En más dimensiones, la relación entre la forma simpléctica y el área del espacio de fase no es tan visualizable, aunque también se puede establecer de forma explícita.⁵

En términos de preservación, diremos que una aplicación lineal $R : \mathbb{R}^{2d} \rightarrow \mathbb{R}^{2d}$ es simpléctica si el área del espacio de fase queda preservada de acuerdo a (18), esto es:

$$\omega(R\eta, R\xi) = \omega(\eta, \xi) \rightarrow \eta^T R^T J R \xi = \eta^T J \xi \rightarrow R^T J R = J. \quad (19)$$

Análogamente, decimos que una aplicación no lineal definida en un abierto $g : U \subset \mathbb{R}^{2d} \rightarrow \mathbb{R}^{2d}$, $(q, p) \mapsto g(q, p)$, es simpléctica si su matriz jacobiana $\partial g(q, p) / \partial (q, p)$ lo es en todas partes de acuerdo a (19), es decir

$$\left(\frac{\partial g(q, p)}{\partial (q, p)} \right)^T J \left(\frac{\partial g(q, p)}{\partial (q, p)} \right) = J. \quad (20)$$

La prueba del Teorema 3.1 es equivalente a demostrar que el flujo generado por las ecuaciones hamiltonianas (15) para cierto valor inicial $(q(0), p(0)) = (q_0, p_0)$, esto es $\phi_t(q_0, p_0) = (q(t), p(t))$, es simpléctico de acuerdo a (20) para todo tiempo [18]:

$$\left(\frac{\partial (q(t), p(t))}{\partial (q_0, p_0)} \right)^T J \left(\frac{\partial (q(t), p(t))}{\partial (q_0, p_0)} \right) = J.$$

3.2. Sistemas hamiltonianos en el fibrado cotangente. Esta subsección es más técnica que las anteriores; se presuponen ciertos conocimientos básicos en geometría diferencial. Empleamos [1, 14] como referencias a consultar en relación a todos los conceptos nuevos presentados, que están allí descritos con todo detalle.

Los sistemas físicos e ingenieriles no siempre evolucionan en un espacio euclídeo (basta considerar un péndulo simple, cuya dinámica se produce en un círculo $S_1 \subset \mathbb{R}^2$). De manera general, diremos que el espacio en el que evolucionan tales sistemas (que llamaremos *espacio de configuración*) es, matemáticamente, una variedad diferenciable de dimensión n y que denotaremos por Q . En pocas palabras, una variedad diferenciable es una superficie abstracta (de dimensión arbitraria) que localmente es difeomorfa a un espacio euclídeo de la misma dimensión (por ejemplo, la superficie de una esfera $S_2 \subset \mathbb{R}^3$, que es “mapeable”, a un plano \mathbb{R}^2). En el entorno de un punto $q \in Q$ utilizaremos las coordenadas (q^i) , $i = 1, \dots, n$, para determinar su imagen euclídea.

A partir de Q se puede definir su *fibrado tangente*, TQ , que es el espacio que comprende todos los espacios tangentes $T_q Q$ a los puntos de Q . Se puede demostrar que $T_q Q$ es un espacio vectorial de dimensión n , y se puede visualizar como el espacio que contiene todos los vectores tangentes a las curvas suaves contenidas en Q que pasan por q . Además, se puede demostrar que TQ también es una variedad diferenciable, con dimensión $2n$ esta

⁵Es fácil ver que en más dimensiones

$$\omega(\eta, \xi) = \sum_{i=1}^d (\eta_q^i (\xi_p)_i - (\eta_p)_i \xi_q^i),$$

y por tanto la forma simpléctica es la suma de las áreas de las proyecciones de P en los planos coordenados (q^i, p_i) .

vez, cuyos puntos en la imagen euclídea se definen por medio de las coordenadas (q^i, \dot{q}^i) , $i = 1, \dots, n$.

Del mismo modo, el *fibrado cotangente* T^*Q de Q es el espacio que contiene todos los espacios duales a T_qQ , es decir T_q^*Q . Se puede demostrar que T^*Q es una variedad diferenciable con coordenadas locales (q^i, p_i) , $i = 1, \dots, n$. Aquí queda expuesto el significado de la posición de el índice i en p_i , adelantado al definir las ecuaciones (15): como subíndice denota un covector, mientras que como superíndice denota un vector. Como vemos, T^*Q tiene dimensión par. En términos algebraicos, T_q^*Q también es un espacio vectorial y, por tanto, cualquiera de sus elementos $\alpha \in T_q^*Q$ se puede definir como $\alpha = p_i dq^i$. Estos elementos son, simplemente, las 1-formas asociadas a los vectores de T_qQ , y por medio de la diferencial exterior, podemos construir formas de mayor orden. En particular:

$$\Omega = d\alpha = dq^i \wedge dp_i. \quad (21)$$

Como vemos, esta 2-forma es no degenerada y constante, lo que implica que también es cerrada. Se puede demostrar, además, que es independiente de las coordenadas (q^i) del punto de Q elegido, lo que la hace globalmente definida en todo T^*Q . En otras palabras, Ω es una forma simpléctica intrínsecamente definida en T^*Q y el par (T^*Q, Ω) conforma una variedad simpléctica.⁶

En relación a los sistemas hamiltonianos, T^*Q será el espacio en el que definiremos nuestra función hamiltoniana, es decir $H : T^*Q \rightarrow \mathbb{R}$; en tal papel adquiere la denominación de espacio de fase. Por medio de la estructura simpléctica de T^*Q podemos definir un campo vectorial hamiltoniano:

Definición 3.1. Sea el punto $(q, p) \in T^*Q$. Un campo vectorial $X_H \in \mathfrak{X}(T^*Q)$ se dice *hamiltoniano* si existe una función $H : T^*Q \rightarrow \mathbb{R}$ tal que

$$i_{X_H}\Omega = dH, \quad (22)$$

donde Ω está definida en (21). Es decir, para todo $v \in T_{(q,p)}T^*Q$, se cumple la igualdad

$$\Omega_{(q,p)}(X_H((q, p)), v) = \langle dH((q, p)), v \rangle, \quad (23)$$

donde $\langle \cdot, \cdot \rangle : T^*T^*Q \times TT^*Q \rightarrow \mathbb{R}$. ◇

Si tal campo vectorial existe, sus ecuaciones dinámicas vienen dadas por

$$(\dot{q}, \dot{p}) = X_H((q, p)). \quad (24)$$

Es fácil ver que, en coordenadas locales, estas ecuaciones son simplemente (15). Indistintamente, nos referiremos a (22) como *ecuaciones hamiltonianas* o *sistema hamiltoniano*. En caso de ser localmente resolubles, denotaremos por $\phi_t : T^*Q \rightarrow T^*Q$ su flujo local inducido, i.e. $(q(t), p(t)) = \phi_t(q(0), p(0)) = \phi_t(q_0, p_0)$. Teniendo esto en cuenta, demostraremos ahora, en una versión más geométrica, las dos propiedades principales de los sistemas hamiltonianos que ya adelantamos en §3.1: la conservación de la función hamiltoniana y la preservación de la forma simpléctica.

Teorema 3.2. *Sea X_H un campo vectorial hamiltoniano definido por (22) y su flujo local asociado ϕ_t . Las siguientes afirmaciones son ciertas a lo largo de las soluciones de X_H :*

1. *H es constante en el tiempo .*
2. *La forma simpléctica Ω es constante en el tiempo.*

⁶Por medio del teorema de Darboux, se puede demostrar que en cualquier variedad simpléctica (P, Ω) es posible hallar unas coordenadas en el entorno de cada punto $z \in P$ tales que Ω es constante. Además, la forma de Ω en esas coordenadas es (21).

Demostración. 1. Utilizando la regla de la cadena y a partir de (24) y (23) vemos que

$$\frac{d}{dt}H(\phi_t(q_0, p_0)) = \langle dH(\phi_t(q_0, p_0)), X_H(\phi_t(q_0, p_0)) \rangle = \Omega(X_H(\phi_t(q_0, p_0)), X_H(\phi_t(q_0, p_0))) = 0,$$

lo que se sigue inmediatamente de la antisimetría de Ω .

2. La evolución de la forma simpléctica a lo largo de las soluciones de X_H viene dada por su *pullback* por el flujo, i.e. $\phi_t^* \Omega$. Por tanto,

$$\frac{d}{dt} \phi_t^* \Omega = \phi_t^* \frac{d}{dt} \Omega = \phi_t^* \mathcal{L}_{X_H} \Omega = \phi_t^* (i_{X_H} d\Omega + d i_{X_H} \Omega) = \phi_t^* (d dH) = 0,$$

donde hemos usado la fórmula mágica de Cartan ($\mathcal{L}_{X_H} \Omega = i_{X_H} d\Omega + d i_{X_H} \Omega$), que $d\Omega = 0$ (es una forma cerrada) la ecuación (22) y que $ddH = 0$ (de nuevo, dH es cerrada). \square

El resultado 2. se puede reinterpretar de la siguiente forma: las soluciones de los campos hamiltonianos X_H son *simplectomorfismos*, es decir, difeomorfismos que preservan la forma simpléctica (o, dicho de otra forma, que relacionan variedades simplécticas con variedades simplécticas de manera suave y biyectiva).

4. INTEGRADORES ENERGÍA-PRESERVANTES: EL GRADIENTE DISCRETO

Describiremos a continuación cierta clase de integradores que preservan la función hamiltoniana. Comenzaremos por considerar los sistemas dinámicos de la forma

$$\dot{x} = \Pi(x) \nabla S(x), \quad (25)$$

con $\Pi(x) \in \mathbb{R}^{n \times n}$ y $S : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ tal que

$$\Pi(x) = -\Pi(x)^T.$$

Es fácil ver que los sistemas hamiltonianos (13) son un caso particular de (25) cuando establecemos $n = 2d$, $\Pi(x) = J$ y $S(x) = H(x)$. Por otro lado, es también fácil ver que la cantidad $S(x)$ se preserva en el tiempo bajo la dinámica (25):

$$\frac{d}{dt} S(x) = \nabla S(x) \dot{x} = \nabla S(x) \Pi(x) \nabla S(x) = 0,$$

lo que sucede, de nuevo, debido a la antisimetría de Π . Si sustituimos Π por J y S por H , vemos que la prueba es completamente análoga a la aportada en §3.1 para la conservación de la función hamiltoniana (energía de los sistemas físicos). Esto justifica su denominación como “energía-preservantes”, si bien, en sentido estricto, deberían denominarse “ S -preservantes”.

Con el objeto de definir un integrador de un paso que preserve S en el tiempo discreto, presentamos los métodos de *gradiente discreto* [6, 12]:

$$\frac{x' - x}{h} = \tilde{\Pi}(x, x', h) \tilde{\nabla} S(x, x'), \quad (26)$$

donde $\tilde{\Pi} : \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n \times \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}^{n \times n}$ es una aproximación adecuada de Π (que debe cumplir $\tilde{\Pi}(x, x, 0) = \Pi(x)$ y ser, naturalmente, antisimétrica) y $\tilde{\nabla} S : \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$ es el llamado *gradiente discreto*.

Definición 4.1. Sea $S : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ una función diferenciable. Se dice que $\tilde{\nabla} S : \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$ es un gradiente discreto si es continuo y satisface

$$\begin{aligned} \tilde{\nabla} S(x, x')^T (x' - x) &= S(x') - S(x), & \text{para todos } x, x' \in \mathbb{R}^n, \\ \tilde{\nabla} S(x, x) &= \nabla S(x), & \text{para todo } x \in \mathbb{R}^n. \end{aligned} \quad (27)$$

Para más detalles remitimos al lector a [6]. \diamond

Aportamos los siguientes ejemplos:

1. El *averaged discrete gradient* [10]:

$$\tilde{\nabla}_{\text{ad}}S(x, x') := \int_0^1 \nabla S((1 - \xi)x + \xi x') d\xi, \quad \text{para } x' \neq x. \quad (28)$$

2. El gradiente discreto de punto medio [6]:

$$\begin{aligned} \tilde{\nabla}_{\text{pm}}S(x, x') &:= \nabla S\left(\frac{x+x'}{2}\right) \\ &+ \frac{S(x') - S(x) - \nabla S\left(\frac{x+x'}{2}\right)^T (x' - x)}{|x' - x|^2} (x' - x), \quad \text{para } x' \neq x. \end{aligned} \quad (29)$$

Probamos ahora la preservación de la función S por los integradores de gradiente discreto:

Proposición 4.1. *Sea $S : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ una función continua y la dinámica discreta (26), con $\tilde{\nabla}S$ de acuerdo a la Definición 4.1. Entonces, $S(x)$ es constante en tiempo discreto.*

Demostración. La conservación en tiempo discreto de S se expresa $S(x') - S(x) = 0$. Vemos que

$$\begin{aligned} S(x') - S(x) &= \tilde{\nabla}S(x, x')^T (x' - x) = \tilde{\nabla}S(x, x')^T h \tilde{\Pi}(x, x', h) \tilde{\nabla}S(x, x') \\ &= h \tilde{\nabla}S(x, x')^T \tilde{\Pi}(x, x', h) \tilde{\nabla}S(x, x') = 0, \end{aligned}$$

como queríamos demostrar. En la primera igualdad empleamos (27) y en la segunda (26). La expresión final es nula debido a la antisimetría de $\tilde{\Pi}$. \square

Es interesante observar la siguiente propiedad, que proporciona una forma sencilla de los gradientes discretos para una clase relevante (en física e ingeniería) de funciones:

Proposición 4.2. *Si $S(x)$ es una función cuadrática, entonces*

$$\tilde{\nabla}_{\text{ad}}S(x, x') = \tilde{\nabla}_{\text{pm}}S(x, x') = \nabla S\left(\frac{x+x'}{2}\right).$$

Demostración. Sin pérdida de generalidad, podemos definir una función cuadrática de la siguiente manera: $S(x) = \frac{1}{2}x^T A x$, con $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ simétrica, i.e. $A^T = A$. De aquí se sigue que $\nabla S(x) = A x$. A partir de esto y del lado derecho de (28) es fácil llegar a la conclusión de la proposición respecto a $\tilde{\nabla}_{\text{ad}}S(x, x')$. Con respecto a $\tilde{\nabla}_{\text{pm}}S(x, x')$, basta con demostrar que se anula el segundo término del lado derecho de (29). En otras palabras

$$\begin{aligned} S(x') - S(x) - \nabla S\left(\frac{x+x'}{2}\right)^T (x' - x) &= \frac{1}{2}x'^T A x' - \frac{1}{2}x^T A x - \frac{1}{2}(x' + x)^T A (x' - x) \\ &= \frac{1}{2}x'^T A x - \frac{1}{2}x^T A x' = 0, \end{aligned}$$

lo que se sigue de la simetría de A . \square

De este resultado se sigue trivialmente que basta elegir el Punto Medio

$$\frac{x' - x}{h} = \Pi\left(\frac{x+x'}{2}\right) \nabla S\left(\frac{x+x'}{2}\right), \quad (30)$$

para establecer un integrador de orden 2 de la dinámica (25) que preserve la función $S(x)$ siempre que ésta sea cuadrática. Respecto a integradores S -preservantes de orden mayor que 2, remitimos al lector a [4], donde se generaliza el *average discrete gradient*.

Ejemplo 4.1. Si elegimos $n = 2$, $x = (q, p)$, $\Pi(q, p) = J$ y $S(q, p) = H(q, p) = \frac{1}{2}q^2 + \frac{1}{2}p^2$, vemos que (30) se puede escribir

$$\frac{q' - q}{h} = \frac{p' + p}{2}, \quad \frac{p' - p}{h} = -\frac{q' + q}{2}. \quad (31)$$

De esta expresión se llega fácilmente a

$$\begin{pmatrix} q' \\ p' \end{pmatrix} = \frac{1}{1 + h^2/4} \begin{pmatrix} 1 - h^2/4 & h \\ -h & 1 - h^2/4 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} q \\ p \end{pmatrix}. \quad (32)$$

Naturalmente, este método es un integrador de orden 2 de (15), de acuerdo a (11) (vemos que basta establecer $x_1 = q$ y $x_2 = p$ para llegar a esta última conclusión). Además, este integrador preserva $H(q, p)$ como queda demostrado en la Proposición 4.2. Por conveniencia del lector, mostramos esta preservación de manera explícita; a partir de (32) vemos que

$$\begin{aligned} H(q', p') &= \frac{1}{2}q'^2 + \frac{1}{2}p'^2 = \frac{1}{2(1 + h^2/4)^2} (((1 - h^2/4)q + hp)^2 + (-hq + (1 - h^2/4)p)^2) \\ &= \frac{1}{2(1 + h^2/4)^2} (((1 - h^2/4)^2 + h^2)q^2 + ((1 - h^2/4)^2 + h^2)p^2) \\ &= \frac{1}{2}q^2 + \frac{1}{2}p^2 = H(q, p). \end{aligned}$$

◇

Finalmente, podemos decir que ésta es la explicación analítica de la conservación de la cantidad E por el integrador Punto Medio que observamos en la Figura 2.

5. INTEGRADORES SIMPLÉCTICOS

5.1. Caso general. El conjunto de los integradores simplécticos es diverso y ha recibido gran atención por parte de la comunidad matemática en las tres últimas décadas [20]. Nos centraremos en integradores que aproximan la dinámica hamiltoniana (15) y cuya preservación de la forma simpléctica ω (16), expresada en el Teorema 3.1, reproducen en tiempo discreto.

Consideraremos los integradores del tipo

$$\frac{q' - q}{h} = \tilde{\nabla}_p H(q, q', p, p'), \quad \frac{p' - p}{h} = \tilde{\nabla}_q H(q, q', p, p'), \quad (33)$$

donde $\tilde{\nabla}_{p,q} H : \mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}^d$ son dos aplicaciones que asumimos lo suficientemente regulares y que deben aproximar $\nabla_p H(q, p)$ y $-\nabla_q H(q, p)$ de manera, al menos, consistente. Bajo las condiciones de regularidad asumidas, el integrador (33) genera un flujo discreto que podemos definir

$$(q', p') = \Phi(h, q, p) = \Phi_h(q, p), \quad (34)$$

con $\Phi : \mathbb{R} \times \mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d$ regular. A continuación, definimos *simplecticidad* a nivel discreto:

Definición 5.1. Decimos que el integrador (33) es *simpléctico* si el flujo discreto (34) es simpléctico. Esto es, de acuerdo a (20), Φ_h satisface:

$$\left(\frac{\partial \Phi_h(q, p)}{\partial (q, p)} \right)^T J \left(\frac{\partial \Phi_h(q, p)}{\partial (q, p)} \right) = J \quad \text{o bien} \quad \left(\frac{\partial (q', p')}{\partial (q, p)} \right)^T J \left(\frac{\partial (q', p')}{\partial (q, p)} \right) = J. \quad (35)$$

Naturalmente, esta condición es una forma de expresar la preservación de la forma simpléctica por la dinámica discreta, es decir:

$$dq' \wedge dp' = dq \wedge dp. \quad (36)$$

Utilizaremos indistintamente (35) y (36) para determinar la simplecticidad de un integrador. \diamond

Ejemplo 5.1. Si fijamos $d = 1$, definimos el método Euler Simpléctico I como

$$\frac{q' - q}{h} = \nabla_p H(q', p), \quad \frac{p' - p}{h} = -\nabla_q H(q', p), \quad (37)$$

esto es, en (33) estamos eligiendo

$$\tilde{\nabla}_p H(q, q', p, p') = \nabla_p H(q', p) \quad y \quad \tilde{\nabla}_q H(q, q', p, p') = -\nabla_q H(q', p).$$

Vemos que, precisamente, este método es (10) si $H(q, p) = \frac{1}{2}p^2 + \frac{1}{2}q^2$ e identificamos $x_1 = q, x_2 = p$.

Proposición 5.1. *El integrador definido por (37) es simpléctico.*

Demostración. Empleamos (36) por simplicidad. A partir de (37), tomando diferenciales, llegamos a

$$\begin{aligned} dq' &= dq + h\nabla_{pq}H dq' + h\nabla_{pp}H dp, \\ dp' &= dp - h\nabla_{qq}H dq' - h\nabla_{qp}H dp, \end{aligned}$$

donde todas las funciones están evaluadas en (q', p) . Por otro lado, asumiendo que H es lo suficientemente regular, vemos que $\nabla_{pq}H = \nabla_{qp}H$. A partir de las últimas ecuaciones se llega a

$$\begin{aligned} dq' &= \frac{1}{1 - h\nabla_{pq}H} dq + h \frac{\nabla_{pp}H}{1 - h\nabla_{pq}H} dp, \\ dp' &= -h \frac{\nabla_{qq}H}{1 - h\nabla_{pq}H} dq + \frac{(1 - h\nabla_{pq}H)^2 - h^2 \nabla_{qq}H \nabla_{pp}H}{1 - h\nabla_{pq}H} dp. \end{aligned}$$

Finalmente, teniendo en cuenta que $dq \wedge dq = dp \wedge dp = 0$, llegamos a

$$dq' \wedge dp' = \frac{(1 - h\nabla_{pq}H)^2 - h^2 \nabla_{qq}H \nabla_{pp}H}{(1 - h\nabla_{pq}H)^2} dq \wedge dp - h^2 \frac{\nabla_{qq}H \nabla_{pp}H}{(1 - h\nabla_{pq}H)^2} dp \wedge dq = dq \wedge dp,$$

como queríamos demostrar. \square

La generalización a más dimensiones es completamente análoga. Por otro lado, se puede demostrar de manera equivalente que el integrador

$$\frac{q' - q}{h} = \nabla_p H(q, p'), \quad \frac{p' - p}{h} = -\nabla_q H(q, p'),$$

también es simpléctico; lo denominamos Euler Simpléctico II. \diamond

Ejemplo 5.2. Sea de nuevo $d = 1$ y $H(q, p) = \frac{1}{2}p^2 + \frac{1}{2}q^2$. El integrador Punto Medio para las ecuaciones (15) en este caso es (31). Podemos calcular el jacobiano $\partial(q', p')/\partial(q, p)$ fácilmente en (32). A partir de éste y utilizando (35) es fácil comprobar que

$$\frac{1}{(1 + h^2/4)^2} \begin{pmatrix} 1 - h^2/4 & -h \\ h & 1 - h^2/4 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 - h^2/4 & h \\ -h & 1 - h^2/4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix},$$

y por tanto concluimos que el integrador es simpléctico. \diamond

5.2. El teorema de Ge y Marsden. Los ejemplos 4.1 y 5.2 nos dicen que (31) es un integrador de las ecuaciones de Hamilton cuando $H(q, p) = \frac{1}{2}p^2 + \frac{1}{2}q^2$ que preserva al mismo tiempo la función hamiltoniana y la forma simpléctica. Éste es un caso óptimo en el que el sistema discreto conserva las dos propiedades geométricas principales del sistema continuo, y que queda explicado por medio del siguiente resultado:

Teorema 5.1 ([19]). *Un integrador Runge–Kutta simpléctico preserva cualquier integral primera de un sistema hamiltoniano que sea cuadrática. Es decir si $x = (q, p) \in \mathbb{R}^{2d}$ y $G \in \mathbb{R}^{2d \times 2d}$, tal que $G = G^T$, entonces $x^{jT} G x^j = x^{j+1T} G x^{j+1}$ para un Runge–Kutta simpléctico.*

Basta mencionar que el integrador Punto Medio es un caso particular de los métodos Runge–Kutta y que, además, es simpléctico, como hemos demostrado en el Ejemplo 5.2, para entender que este resultado se aplica a nuestro caso de estudio, ya que la función hamiltoniana es cuadrática.

Sin embargo, este escenario (integrales primeras cuadráticas para sistemas hamiltonianos) es muy restrictivo. En términos generales, la relación entre integradores simplécticos y la conservación de la función hamiltoniana (de cualquier forma) viene dada por el siguiente resultado, el teorema de Ge y Marsden:

Teorema 5.2 (Teorema de Ge y Marsden [5]). *Sea un sistema hamiltoniano en el que sus todas sus integrales primeras dependen de la función hamiltoniana (es decir, si $F : \mathbb{R}^{2d} \rightarrow \mathbb{R}$ es tal que $\dot{F} = 0$, entonces existe una función suave $F_0 : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ tal que $F(x) = F_0(H(x))$). En este caso, si tenemos un integrador simpléctico que preserva la función hamiltoniana H , entonces el integrador es simplemente la solución exacta del sistema hamiltoniano para un paso de tiempo h , módulo una reparametrización temporal.*

Este teorema supone un resultado negativo: para una clase de sistemas hamiltonianos (aquellos que no tienen integrales primeras independientes de la función hamiltoniana) un integrador *no* puede conservar al mismo tiempo H y la forma simpléctica; si encontramos uno, eso sólo significa que es la solución exacta salvo una reparametrización del tiempo. Aunque la hipótesis del teorema parece demasiado fuerte, la clase de sistemas que no tienen integrales primeras independientes del hamiltoniano es grande, y casi general en algunos casos, por ejemplo variedades simplécticas compactas con 4 dimensiones [13].

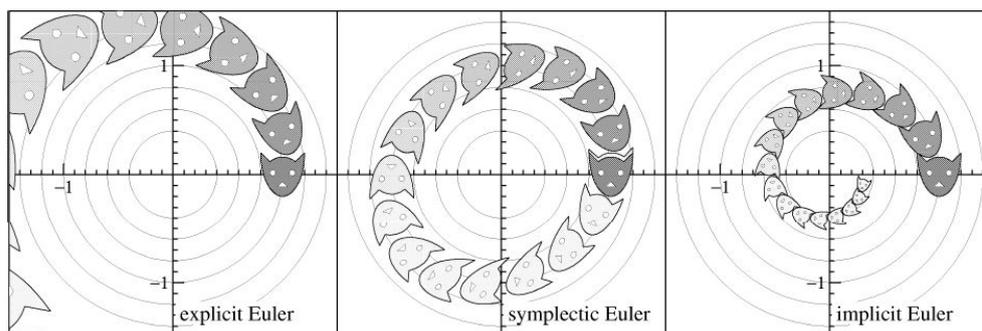


FIGURA 4. Los gatos de Arnold.

La Figura 4 muestra el comportamiento de los integradores simplécticos respecto a la conservación de la energía. Como hemos expuesto en §3.1, la forma simpléctica se puede interpretar como el área del espacio de fase, representada en la figura por el área de la cara del gato. Por su lado, para un hamiltoniano $H = \frac{1}{2}q^2 + \frac{1}{2}p^2$, es fácil ver que sus conjuntos

de nivel son círculos en ese mismo espacio de fase. En el lado de la izquierda, vemos cómo el integrador (el Euler Explícito) no preserva H (no se mueve en el círculo) ni la forma simpléctica (el área de la cara del gato), que aumenta con el tiempo. Lo mismo, pero en sentido opuesto, ocurre con el Euler Implícito: $(x' - x)/h = J\nabla H(x')$ (lado de la derecha). En el centro se muestra el comportamiento del Euler Simpléctico I: el área de la cara del gato se preserva, pero no así H , como prescribe el teorema de Ge y Marsen, ya que el avance en tiempo discreto no se produce en el círculo. Sin embargo, aunque esta preservación no se da, observamos que no se desvía demasiado, comportamiento que quedará explicado en la sección dedicada al *backward error analysis*.

5.3. Integradores variacionales. Como mencionamos en la intrducción, presentamos ahora una forma de construir integradores simplécticos de manera sistemática: los denominados *integradores variacionales*. El modo habitual de presentarlos parte del lado *lagrangiano* de la mecánica [15, 16], obteniendo la versión discreta de las ecuaciones de Euler–Lagrange (cuya naturaleza es variacional) y desde éstas, por medio de la transformación de Legendre discreta, el integrador para las ecuaciones de Hamilton. Por coherencia con el resto de las notas, partimos aquí desde el lado hamiltoniano y describimos un método constructivo de obtenerlos.

Sea un sistema hamiltoniano definido por la función $H : \mathbb{R}^{2d} \rightarrow \mathbb{R}$. Decimos que este sistema es regular si la transformación

$$\dot{q}^i = \frac{\partial H}{\partial p_i}(q, p) \tag{38}$$

es biyectiva localmente entre las variables \dot{q} y p , una vez fijado q . Si tal es el caso, podemos definir la llamada *función Lagrangiana* $L : \mathbb{R}^{2d} \rightarrow \mathbb{R}$, $(q, \dot{q}) \mapsto L(q, \dot{q})$, por medio de la siguiente relación:

$$L(q, \dot{q}) = p_i \dot{q}^i - H(q, p). \tag{39}$$

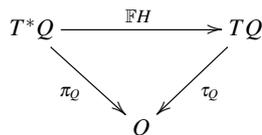
A las ecuaciones (38) y (39), juntas o por separado, se las denomina *transformación de Legendre* [1].⁷

Considerando la curva $q : [0, T] \subset \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}^d$ suave, es decir $q \in C^\infty([0, T], \mathbb{R}^d)$, por medio de la función lagrangiana (que será función de la curva y de su derivada), podemos definir la denominada *acción* $\mathcal{A} : C^\infty([0, T], \mathbb{R}^d) \rightarrow \mathbb{R}$:

$$\mathcal{A}(q) := \int_0^T L(q(t), \dot{q}(t)) dt, \tag{40}$$

donde asumimos que L es lo suficientemente regular para que la integral esté definida para todo t (tradicionalmente, se asume $L \in C^2$, regularidad necesaria para obtener las ecuaciones de Euler–Lagrange de manera variacional a partir de (40) [1]). Denominaremos *lagrangiano*

⁷A nivel geométrico, la transformación de Legendre (38) establece una relación entre los fibrados cotangente y tangente de Q presentados en §3.2. Como hemos mencionado arriba, esta relación se establece entre las coordenadas p y \dot{q} (es decir, entre los momentos y las velocidades de nuestros sistemas físicos) una vez fijado el punto de la variedad de configuración q ; en otras palabras, globalmente define la aplicación $\mathbb{F}H : T^*Q \rightarrow TQ$, $(q, p) \mapsto (q, \dot{q} = \partial H(q, p)/\partial p)$, de tal modo que el siguiente diagrama es conmutativo:



donde $\pi_Q : T^*Q \rightarrow Q$, $(q, p) \mapsto (q)$ y $\tau_Q : TQ \rightarrow Q$, $(q, \dot{q}) \mapsto (q)$ son las proyecciones canónicas. Cuando consideramos cualquier variedad Q , (38) y el anterior diagrama definen la función lagrangiana $L : TQ \rightarrow \mathbb{R}$ y su acción (40) asociada.

discreto, $L_d : \mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$, a una aproximación de la acción en el intervalo temporal definido por el paso discreto del integrador que queremos construir, esto es:

$$L_d(q, q') \simeq \int_0^h L(q(t), \dot{q}(t)) dt. \quad (41)$$

Como es natural, utilizando el método de cuadratura adecuado, esta aproximación puede ser todo lo precisa que deseemos, alcanzando un error local de truncación de orden r , es decir:

$$\left| L_d(q, q') - \int_0^h L(q(t), \dot{q}(t)) dt \right| = O(h^{r+1}). \quad (42)$$

Finalmente, consideraremos que L_d es, al menos, C^2 , y que la matriz $\partial^2 L_d / \partial q \partial q'$ es no degenerada.

Ejemplo 5.3. Es fácil de demostrar utilizando desarrollos de Taylor que

$$L_d(q, q') = hL\left(\frac{q+q'}{2}, \frac{q'-q}{h}\right) \quad (43)$$

es una aproximación $r = 2$ de la acción. Para definirla, estamos aproximando las curvas q, \dot{q} de la siguiente manera:

$$q(h) \simeq \frac{q+q'}{2}, \quad \dot{q}(h) \simeq \frac{q'-q}{h}.$$

Vemos que estamos considerando el punto medio como aproximación de la curva en $t = h$ y el operador discreto de Euler (*backward*) para su derivada. \diamond

Una vez hemos definido nuestro lagrangiano discreto, podemos presentar los integradores variacionales basados en él:

Definición 5.2. Dado un lagrangiano discreto (41) construido a partir de la función hamiltoniana H y su transformada de Legendre (38), (39), definimos el correspondiente integrador variacional de la dinámica hamiltoniana (15) como

$$p = -\frac{\partial L_d}{\partial q}(q, q'), \quad p' = \frac{\partial L_d}{\partial q'}(q, q'), \quad (44)$$

donde L_d es, al menos, C^2 y la matriz $\partial^2 L_d / \partial q \partial q'$ es no degenerada. Estas condiciones de regularidad permiten definir, por medio del teorema de la función implícita, un integrador $(q, p) \mapsto (q', p')$ que aproxima la dinámica de (15). \diamond

Teorema 5.3. *El integrador (44) es simpléctico.*

Demostración. Empleamos de nuevo (36). A partir de (44) vemos que

$$\begin{aligned} dp &= -\frac{\partial^2 L_d}{\partial q \partial q} dq - \frac{\partial^2 L_d}{\partial q' \partial q} dq', \\ dp' &= -\frac{\partial^2 L_d}{\partial q \partial q'} dq - \frac{\partial^2 L_d}{\partial q' \partial q'} dq'. \end{aligned}$$

Por tanto,

$$dq' \wedge dp' = \frac{\partial^2 L_d}{\partial q \partial q'} dq' \wedge dq \quad \text{y} \quad dp \wedge dq = -\frac{\partial^2 L_d}{\partial q' \partial q} dq' \wedge dq.$$

Dado que L_d es C^2 (las derivadas cruzadas son iguales) y $\partial^2 L_d / \partial q' \partial q$ es no degenerada, concluimos que $dq' \wedge dp' = -dp \wedge dq = dq \wedge dp$ y el resultado queda demostrado. \square

Ejemplo 5.4. Dada la función hamiltoniana $H(q, p) = \frac{1}{2}q^2 + \frac{1}{2}p^2$, con $d = 1$, es fácil ver que a partir de (38) y (39) llegamos a $L(q, \dot{q}) = \frac{1}{2}\dot{q}^2 - \frac{1}{2}q^2$. Desde aquí, (43) define el siguiente lagrangiano discreto:

$$L_d(q, q') = \frac{1}{2} \frac{(q' - q)^2}{h} - \frac{1}{2} h \left(\frac{q' + q}{2} \right)^2.$$

El integrador variacional correspondiente (44) es

$$p = \frac{q' - q}{h} + \frac{h}{2} \left(\frac{q' + q}{2} \right), \quad p' = \frac{q' - q}{h} - \frac{h}{2} \left(\frac{q' + q}{2} \right).$$

Desde estas ecuaciones es fácil llegar a (31). En otras palabras, el lagrangiano discreto (43) nos proporciona el integrador Punto Medio para la dinámica (15) y el hamiltoniano elegido. Como hemos demostrado hasta ahora, este integrador preserva energía, preserva la forma simpléctica (lo que ya podía adelantarse a partir de Teorema 5.3) y además tiene un orden local de truncación $r = 2$. Este hecho también se puede adelantar a partir del Teorema 5.4, enunciado más abajo. \diamond

Ejemplo 5.5. En el mismo caso del ejemplo anterior, es fácil ver que los lagrangianos discretos

$$L_d(q, q') = hL \left(q, \frac{q' - q}{h} \right) \quad \text{y} \quad L_d(q, q') = hL \left(q', \frac{q' - q}{h} \right)$$

generan los integradores Euler Simplécticos I y II, respectivamente, a partir de (44). Por medio de desarrollos de Taylor es fácil ver que estos lagrangianos discretos son aproximaciones de la acción con orden igual a 1, lo que, de nuevo, es consistente con el orden de sus integradores asociados. \diamond

Como se puede intuir a partir del ejemplo anterior, una de las virtudes de los integradores variacionales, definidos por (44), es que su orden de error local de truncación queda determinado por la aproximación del lagrangiano discreto a la acción continua (42). Esta circunstancia queda enunciada en el siguiente teorema:

Teorema 5.4 ([15, 17]). *Sea una función hamiltoniana H y su lagrangiano discreto L_d asociado por medio de (38), (39) y (42). Las siguientes afirmaciones son equivalentes:*

1. *El orden de error local de truncación de L_d respecto a la acción es r , es decir:*

$$\left| L_d(q, q') - \int_0^h L(q(t), \dot{q}(t)) dt \right| = O(h^{r+1}).$$

2. *El orden de error local de truncación del integrador variacional (44) con respecto a (15) es r .*

5.4. Backward error analysis. La noción de *backward error analysis* (BEA en adelante) está estrechamente relacionada con el concepto de *sistema modificado*, y data originalmente de [22] en el área de álgebra numérica.

En §2 hemos presentado las nociones de error (local en Definición 2.1 y global en Definición 2.2) que se producen al comparar la solución de la dinámica continua de (1) y la correspondiente dinámica discreta (3). En ambos casos, estudiamos el comportamiento del error cuando el integrador avanza (*goes forward*) en el tiempo discreto. Por su lado, la noción de BAE (*backward*) se basa en la idea de encontrar un *sistema de ecuaciones diferenciales modificadas*

$$\dot{\tilde{x}} = \tilde{f}_h(\tilde{x}) = \tilde{f}_0(\tilde{x}) + h\tilde{f}_1(\tilde{x}) + h^2\tilde{f}_2(\tilde{x}) + \dots, \quad \tilde{x}(0) = x_0, \quad (45)$$

tales que su solución continua es igual a la solución discreta de (3).⁸ En otras palabras, el campo vectorial modificado $\tilde{f}_h : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$ debe ser tal que su solución cumpla

$$x^{l'} = \tilde{x}(t^{l'}),$$

donde la notación l' implica $l \in \mathbb{N}$ iteraciones tanto en el tiempo discreto como en la dinámica discreta (3). En particular, esto debe cumplirse en el primer paso:

$$x' = \tilde{x}(t'). \quad (46)$$

A partir de esta última ecuación y de (5) vemos que es posible obtener \tilde{f}_h de manera constructiva, es decir:

$$\begin{aligned} \tilde{x}(t') &= \tilde{x} + h\tilde{x}' + \frac{h^2}{2}\tilde{x}'' + \frac{h^3}{3!}\tilde{x}''' + \dots \\ &= \tilde{x} + h(\tilde{f}_0(\tilde{x}) + h\tilde{f}_1(\tilde{x}) + h^2\tilde{f}_2(\tilde{x}) + \dots) \\ &\quad + \frac{h^2}{2}(\nabla\tilde{f}_0(\tilde{x}) + h\nabla\tilde{f}_1(\tilde{x}) + h^2\nabla\tilde{f}_2(\tilde{x}) + \dots) \cdot (\tilde{f}_0(\tilde{x}) + h\tilde{f}_1(\tilde{x}) + h^2\tilde{f}_2(\tilde{x}) + \dots) + \dots \\ &= \tilde{x} + h\tilde{f}_0(\tilde{x}) + h^2 \left(\tilde{f}_1(\tilde{x}) + \frac{1}{2}\nabla\tilde{f}_0(\tilde{x}) \cdot \tilde{f}_0(\tilde{x}) \right) \\ &\quad + h^3 \left(\tilde{f}_2(\tilde{x}) + \frac{1}{2}\nabla\tilde{f}_1(\tilde{x}) \cdot \tilde{f}_0(\tilde{x}) + \frac{1}{2}\nabla\tilde{f}_0(\tilde{x}) \cdot \tilde{f}_1(\tilde{x}) \right) + \dots, \end{aligned} \quad (47)$$

donde usamos ∇ para denotar el jacobiano de cualquier función evaluada en \mathbb{R}^n y \cdot para el producto entre matrices de cualquier tamaño siempre que esté bien definido. Teniendo en cuenta esta última ecuación, (46) y (5) concluimos que

$$\begin{aligned} \tilde{f}_0 &= f_{h,0} = f, \\ \tilde{f}_1 + \frac{1}{2}\nabla\tilde{f}_0 \cdot \tilde{f}_0 &= f_{h,1} \quad \rightarrow \quad \tilde{f}_1 = f_{h,1} - \frac{1}{2}\nabla\tilde{f}_0 \cdot \tilde{f}_0, \\ \tilde{f}_2 + \frac{1}{2}\nabla\tilde{f}_1 \cdot \tilde{f}_0 + \frac{1}{2}\nabla\tilde{f}_0 \cdot \tilde{f}_1 &= f_{h,2} \quad \rightarrow \quad \tilde{f}_2 = f_{h,2} - \frac{1}{2}\nabla\tilde{f}_1 \cdot \tilde{f}_0 - \frac{1}{2}\nabla\tilde{f}_0 \cdot \tilde{f}_1, \\ \dots &= \dots \end{aligned} \quad (48)$$

donde, recordamos, los campos vectoriales discretos $f_{h,i}(x)$ están totalmente determinados a partir de $f_h(x, x')$ y $f(x)$. En condiciones normales, la serie (47) no converge y debe ser truncada adecuadamente.

La construcción de la serie modificada (47) nos permite obtener una comprensión más profunda del comportamiento cualitativo de la solución numérica y del error global. Como es fácil de ver, éste, de acuerdo a Definición 2.2, adquiere la forma $|\tilde{x}(T) - x(T)|$. Por otro lado, conocer el error local de truncación del método numérico bajo estudio permite simplificar la serie modificada de acuerdo al siguiente resultado.

Teorema 5.5. *Supongamos que cierto método numérico (3) tiene orden de error local de truncación r , lo que de acuerdo a Definición 2.1 implica que*

$$x' = x(t') + O(h^{r+1}) \quad \text{y por tanto} \quad x' = x(t') + h^{r+1}\delta(x) + O(h^{r+2}), \quad (49)$$

⁸Empleamos la distinción tilde tanto en la variable como en los campos vectoriales, lo que puede resultar redundante. Lo hacemos para enfatizar que la solución de este sistema de ecuaciones diferenciales difiere del original $\dot{x} = f(x)$. Por otro lado, suprimiremos la tilde en las variables cuando pueda generar confusión.

donde $\delta : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}^d$ es el término dominante en la expansión. En ese caso, la ecuación modificada (45) adquiere la forma

$$\dot{\tilde{x}} = f(\tilde{x}) + h^r \tilde{f}_r(\tilde{x}) + h^{r+1} \tilde{f}_{r+1}(\tilde{x}) + \cdots, \quad \tilde{x}(0) = x_0,$$

donde $\tilde{f}_r(\tilde{x}) = \delta(\tilde{x})$.

Demostración. Si un método tiene orden de error local de truncación r , eso significa que $f_{h,i} = f_i$, para $i = 0, 1, 2, \dots, r$, en las expansiones (4) y (5), de acuerdo a (6). En particular, $f_{h,0} = f_0 = f$. Por otro lado, a partir de (48) se puede comprobar que $\tilde{f}_0 = f_0 = f$ y $\tilde{f}_i = 0$, para $i = 1, \dots, r-1$ (como ejemplo, exponemos que $\tilde{f}_1 = f_{h,1} - \frac{1}{2} \nabla f_0 \cdot \tilde{f}_0 = f_{h,1} - \frac{1}{2} \nabla f \cdot f$; ya que $f_{h,1} = \frac{1}{2} \nabla f \cdot f$, se concluye que $\tilde{f}_1 = 0$). Finalmente, la expresión para \tilde{f}_r se sigue fácilmente de (49). \square

BEA resulta de especial utilidad cuando consideramos sistemas hamiltonianos e integradores simplécticos; es decir $f(x) = J\nabla H(x)$ (13) y los métodos presentados en §5. En este caso, la ecuación modificada (45) adquiere una forma determinada, en particular hamiltoniana (lo que se mostrará en Teorema 5.6). Como resultado preparatorio, presentamos el siguiente lema:

Lema 5.1. *Sea $D \subset \mathbb{R}^n$ (en particular $n = 2d$) un abierto y $f : D \rightarrow \mathbb{R}^n$ tal que $f \in C^1$, con jacobiano ∇f simétrico para todo $x \in D$. Entonces, para cada $x_0 \in D$ existe un abierto y una función $H : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ tal que*

$$f(x) = \nabla H(x).$$

Véase la prueba en [7, p. 176]. Podríamos considerar este último resultado como una versión euclídea del lema de Poincaré.

Teorema 5.6 ([3, 21]). *Sea un integrador simpléctico aplicado a un sistema hamiltoniano. Entonces, la ecuación modificada (45) también es hamiltoniana. Más precisamente, existen las funciones $H_i : \mathbb{R}^{2d} \rightarrow \mathbb{R}$, $i \in \mathbb{N}$, tales que $\tilde{f}_i(x) = J\nabla H_i(x)$.*

Demostración. Procedemos por inducción. En primer lugar, asumimos que la ecuación modificada

$$\dot{x} = \tilde{f}(x) + h^1 \tilde{f}_1(x) + h^2 \tilde{f}_2(x) + \cdots + h^r \tilde{f}_r(x) \quad (50)$$

cumple las hipótesis del teorema, esto es, existe H_i tal que $\tilde{f}_i = J\nabla H_i$ (lo que se satisface en el origen $r = 0$ de la inducción, ya que nuestro sistema original es hamiltoniano y por tanto $\tilde{f} = J\nabla H$). La prueba consiste en demostrar que si añadimos un término más a la serie (50), i.e. $h^{r+1} \tilde{f}_{r+1}$, entonces \tilde{f}_{r+1} también es hamiltoniano.

Definamos

$$x' = \Phi_h(x) \quad \text{y} \quad \tilde{x}(t') = \varphi_h(x),$$

donde Φ_h es la solución numérica de un integrador de orden r que asumimos simpléctico y φ_h la solución exacta de (50), que también estamos asumiendo simpléctica ya que procede de un sistema hamiltoniano. De acuerdo al Teorema 5.5, ambos flujos se relacionan de la siguiente manera

$$\Phi_h(x) = \varphi_h(x) + h^{r+1} \tilde{f}_{r+1}(x) + O(h^{r+2})$$

(donde \tilde{f}_{r+1} juega el papel de δ en el mencionado teorema). Tomando el jacobiano a ambos lados y teniendo en cuenta que $\nabla \varphi_h(x) = I_{2d} + O(h)$ (por su condición de flujo exacto), podemos establecer la siguiente relación:

$$(\nabla \Phi_h(x))^T J \nabla \Phi_h(x) = J + h^{r+1} ((\nabla \tilde{f}_{r+1}(x))^T J + J \nabla \tilde{f}_{r+1}(x)) + O(h^{r+2}).$$

Dado que Φ_h es un integrador simpléctico, de acuerdo a (20) el lado derecho de la ecuación anterior debe ser igual a J y por tanto todos los términos perturbativos deben anularse, en particular el término h^{r+1} . Como consecuencia, vemos que \tilde{f}_{r+1} ha de ser tal que

$$J\nabla\tilde{f}_{r+1} = -(\nabla\tilde{f}_{r+1})^T J = (J\nabla\tilde{f}_{r+1})^T,$$

es decir,

$$\nabla(J\tilde{f}_{r+1}) = (\nabla(J\tilde{f}_{r+1}))^T,$$

donde se ha aplicado la antisimetría de J . En otras palabras, la función $J\tilde{f}_{r+1}$ tiene un jacobiano simétrico, y en virtud del Lema 5.1 podemos concluir que $\tilde{f}_{r+1} = J\nabla H_{r+1}$ para cierta función H_{r+1} , como queríamos demostrar. \square

Este resultado, en combinación con otras propiedades de los integradores simplécticos relacionadas con las *funciones generatrices* (ver [7, §IX.3.2] para más detalles) permite establecer el siguiente corolario:

Corolario 5.1. *Sea un integrador simpléctico aplicado a un sistema hamiltoniano con función hamiltoniana H . Entonces, el sistema de ecuaciones diferenciales modificado (45) es también hamiltoniano, con función hamiltoniana*

$$\tilde{H}(x) = H(x) + hH_1(x) + h^2H_2(x) + h^3H_3(x) + \dots$$

En otras palabras, el integrador simpléctico en particular no preserva H del sistema original, pero sí preserva \tilde{H} del sistema modificado, en virtud de (46) (el método numérico equivale a la solución exacta del sistema modificado, que a su vez es hamiltoniano y por tanto preserva \tilde{H} de manera exacta). Dado que conocemos H pero no \tilde{H} , esta preservación será oscilatoria, aunque (si los conjuntos de nivel de H y \tilde{H} están acotados) el valor numérico de la energía no se desviará del H original independientemente de lo largo que sea el tiempo de integración. Esto explica el comportamiento observado en la Figura 2 por parte del método Euler Simpléctico I. También explica el comportamiento del Euler Simpléctico I en la Figura 4: el integrador no se mueve en el círculo (lo que implicaría la preservación de H), pero lo hace en una trayectoria cercana (lo que implica la preservación de \tilde{H} , que es una perturbación de H).

AGRADECIMIENTOS

Estoy muy agradecido a los organizadores del Congreso Monteiro 2021 por haberme elegido para dar este curso. Asimismo, estoy muy agradecido a Diego Estrada Sedano por su asistencia con las figuras.

REFERENCIAS

- [1] R. H. Abraham and J. E. Marsden, *Foundations of Mechanics*, second edition, Benjamin/Cummings, Advanced Book Program, Reading, MA, 1978. [MR 0515141](#).
- [2] V. I. Arnold, *Mathematical Methods of Classical Mechanics*, second edition, Graduate Texts in Mathematics, 60, Springer, New York, 1989. [MR 0997295](#).
- [3] G. Benettin and A. Giorgilli, On the Hamiltonian interpolation of near-to-the-identity symplectic mappings with application to symplectic integration algorithms, *J. Statist. Phys.* **74** (1994), no. 5-6, 1117–1143. [MR 1268787](#).
- [4] D. Cohen and E. Hairer, Linear energy-preserving integrators for Poisson systems, *BIT* **51** (2011), no. 1, 91–101. [MR 2784654](#).
- [5] Z. Ge and J. E. Marsden, Lie–Poisson Hamilton–Jacobi theory and Lie–Poisson integrators, *Phys. Lett. A* **133** (1988), no. 3, 134–139. [MR 0967725](#).

- [6] O. Gonzalez, Time integration and discrete Hamiltonian systems, *J. Nonlinear Sci.* **6** (1996), no. 5, 449–467. [MR 1411343](#).
- [7] E. Hairer, C. Lubich, and G. Wanner, *Geometric numerical integration*, Springer Series in Computational Mathematics, 31, Springer, Berlin, 2002. [MR 1904823](#).
- [8] E. Hairer, S. P. Nørsett, and G. Wanner, *Solving Ordinary Differential Equations I: Nonstiff Problems*, second edition, Springer Series in Computational Mathematics, 8, Springer, Berlin, 1993. [MR 1227985](#).
- [9] E. Hairer and G. Wanner, *Solving Ordinary Differential Equations II: Stiff and Differential-algebraic Problems*, second edition, Springer Series in Computational Mathematics, 14, Springer, Berlin, 1996. [MR 1439506](#).
- [10] A. Harten, P. D. Lax, and B. van Leer, On upstream differencing and Godunov-type schemes for hyperbolic conservation laws, *SIAM Rev.* **25** (1983), no. 1, 35–61. [MR 0693713](#).
- [11] R. McLachlan and R. Quispel, Six lectures on the geometric integration of ODEs, in *Foundations of Computational Mathematics (Oxford, 1999)*, 155–210, London Math. Soc. Lecture Note Ser., 284, Cambridge Univ. Press, Cambridge, 2001. [MR 1836618](#).
- [12] R. I. McLachlan, G. R. W. Quispel, and N. Robidoux, Geometric integration using discrete gradients, *R. Soc. Lond. Philos. Trans. Ser. A Math. Phys. Eng. Sci.* **357** (1999), no. 1754, 1021–1045. [MR 1694701](#).
- [13] L. Markus and K. R. Meyer, *Generic Hamiltonian dynamical systems are neither integrable nor ergodic*, Memoirs of the American Mathematical Society, No. 144, Amer. Math. Soc., Providence, RI, 1974. [MR 0451301](#).
- [14] J. E. Marsden and T. S. Ratiu, *Introduction to Mechanics and Symmetry*, second edition, Texts in Applied Mathematics, 17, Springer, New York, 1999. [MR 1723696](#).
- [15] J. E. Marsden and M. West, Discrete mechanics and variational integrators, *Acta Numer.* **10** (2001), 357–514. [MR 2009697](#).
- [16] J. Moser and A. P. Veselov, Discrete versions of some classical integrable systems and factorization of matrix polynomials, *Comm. Math. Phys.* **139** (1991), no. 2, 217–243. [MR 1120138](#).
- [17] G. W. Patrick and C. Cuell, Error analysis of variational integrators of unconstrained Lagrangian systems, *Numer. Math.* **113** (2009), no. 2, 243–264. [MR 2529508](#).
- [18] H. Poincaré, *Les méthodes nouvelles de la mécanique céleste. Tome III*, Gauthier-Villars, Paris, 1899.
- [19] J. M. Sanz-Serna, Runge-Kutta schemes for Hamiltonian systems, *BIT* **28** (1988), no. 4, 877–883. [MR 0972812](#).
- [20] J. M. Sanz-Serna, Symplectic integrators for Hamiltonian problems: an overview, in *Acta Numerica, 1992*, 243–286, Cambridge Univ. Press, Cambridge, 1992. [MR 1165727](#).
- [21] Y.-F. Tang, Formal energy of a symplectic scheme for Hamiltonian systems and its applications I, *Comput. Math. Appl.* **27** (1994), no. 7, 31–39. [MR 1265396](#).
- [22] J. H. Wilkinson, Error analysis of floating-point computation, *Numer. Math.* **2** (1960), 319–340. [MR 0116477](#).

(Fernando Jiménez) DEPARTAMENTO DE MATEMÁTICAS APLICADAS A LA INGENIERÍA INDUSTRIAL,
UNIVERSIDAD POLITÉCNICA DE MADRID, JOSÉ GUTIÉRREZ ABASCAL 2, 28006 MADRID, ESPAÑA
Email address: fernando.jimenez.alburquerque@upm.es